

Институт биологии южных морей имени А. О. Ковалевского РАН

PONTUS EUXINUS
ПОНТ ЭВКСИНСКИЙ : XII



ПОНТ ЭВКСИНСКИЙ – 2021

XII Всероссийская научно-практическая конференция молодых учёных с международным участием по проблемам водных экосистем, посвященная 150-летию Севастопольской биологической станции – ФИЦ «Институт биологии южных морей имени А. О. Ковалевского РАН»

Материалы конференции

Севастополь, 20–24 сентября 2021 г.

Севастополь
ФИЦ ИнБЮМ
2021

КОМПЬЮТЕРНЫЙ ДИЗАЙН ИНГИБИТОРОВ ВОДОРΟΣЛЕВЫХ КАРБОУАНГИДРАЗ

Кондратьев М. С.¹, Терентьев В. В.², Шитов А. В.²

¹Институт биофизики клетки РАН, Пущино

²Институт фундаментальных проблем биологии РАН, Пущино

Ключевые слова: карбоангидразы, водоросли, ингибиторы, лиганды, квантовая химия, докинг

«Цветение» воды – т.е. массовое размножение и резкое увеличение общей биомассы водорослей является существенной проблемой как многих открытых водоемов, так и искусственных систем хранения технической воды. Для борьбы с этим явлением разумно применять селективные ингибиторы, безвредные для позвоночных животных, но подавляющие активность фотосинтезирующих микроорганизмов. Одной из наиболее уязвимых систем у них являются ферменты карбоангидразы, принимающие участие в образовании углеводов при фотосинтезе – например, белок Cаh3 [1], который был выбран нами в качестве модельной системы для поиска эффективных ингибиторов карбоангидраз.

В данной работе при помощи современных методов вычислительной биофизики (квантово-химические расчеты РМ7, гибкий докинг, компьютерный анализ топологии комплексов «лиганд+рецептор» [2, 3]) проанализированы особенности некоторых структурных и термодинамических параметров молекул ингибиторов карбоангидразы Cаh3 из *Chlamydomonas reinhardtii*.

Выполненные нами квантово-химические расчеты позволили исследовать конформационную лабильность ряда веществ-кандидатов, молекул на основе сурьмы. Эти симметричные соединения с двумя бензольными кольцами, а также с галогеновыми заместителями [4], являются такими же эффективными ингибиторами изучаемого фермента, как и классические соединения: ацетазоламид, этоксизоламид, ТФМСА. Для галогеновых производных нами показано уменьшение термодинамической стабильности таких молекул в ряду F–Cl–Br–I, а также отмечена важная стабилизирующая роль водородных связей между N–H и бензольными кольцами.

При помощи методов гибкого докинга нами изучен механизм взаимодействия ряда ингибиторов с аминокислотными остатками, формирующими активный центр карбоангидразы Cаh3.

Работа выполнена в инициативном порядке при поддержке ООО «Биодизайн».

Литература:

1. Benlloch R., Shevela D., Hainzl T., Grundström C., Shutova T., Messinger J., Samuelsson G., Sauer-Eriksson A. E. Crystal structure and functional characterization of photosystem II-associated carbonic anhydrase CAH3 in *Chlamydomonas reinhardtii* // Plant Physiology. 2015. Vol. 167, iss. 3. P. 950–962. <https://doi.org/10.1104/pp.114.253591>
2. Laskowski R. A., Swindells M. B. LigPlot+: multiple ligand-protein interaction diagrams for drug discovery // Journal of Chemical Information and Modeling. 2011. Vol. 51, iss. 10. P. 2778–2786. <https://doi.org/10.1021/ci200227u>
3. Adasme M. E., Linnemann K. E., Bolz S. N., Kaiser F., Salentin S., Haupt V. J., Schroeder M. PLIP 2021: expanding the scope of the protein–ligand interaction profiler to

DNA and RNA // Nucleic Acids Research. 2021. Vol. 49, iss. W1. P. W530–W534.
<https://doi.org/10.1093/nar/gkab294>

4. Karacan M. S., Zharmukhamedov S. K., Mamaş S., Kupriyanova E. V., Shitov A. V., Klimov V. V., Özbek N., Özmen Ü., Gündüzalp A., Schmitt F. J., Karacan N., Friedrich T., Los D. A., Carpentier R., Allakhverdiev S. I. Screening of novel chemical compounds as possible inhibitors of carbonic anhydrase and photosynthetic activity of photosystem II // Journal of Photochemistry and Photobiology B: Biology. 2014. Vol. 137. P. 156–167.
<https://doi.org/10.1016/j.jphotobiol.2013.12.002>

НАКОПИТЕЛЬНАЯ СПОСОБНОСТЬ ГИДРОБИОНТОВ СЕВАСТОПОЛЬСКОЙ БУХТЫ В ОТНОШЕНИИ РАДИОИЗОТОПОВ ПЛУТОНИЯ

**Параскив А. А.¹, Терещенко Н. Н.¹, Проскурнин В. Ю.¹,
Чужикова-Проскурнина О. Д.¹, Трапезников А. В.², Платаев А. П.²**

¹ФИЦ «Институт биологии южных морей им. А. О. Ковалевского РАН»,
г. Севастополь

²Институт экологии растений и животных УрО РАН, г. Екатеринбург

Ключевые слова: радиоизотопы плутония, гидробионты, Севастопольская бухта, коэффициенты накопления

Техногенные радиоизотопы плутония в результате использования человеком ядерных технологий в военных и мирных целях поступили в природные экосистемы, включая моря и океаны. С одной стороны, радиоизотопы плутония альфа-излучающие радиоактивные вещества, с другой стороны, по химической природе плутоний – тяжелый металл. В обоих случаях это высокотоксичное вещество, которое при превышении допустимых уровней будет оказывать негативное влияние на экологическое состояние вод и жизнедеятельность гидробионтов. Радиоизотопы плутония ^{239}Pu и ^{240}Pu имеют большие периоды полураспада (24400 лет и 6620 лет, соответственно) поэтому сохраняются в экосистемах долгое время и их количество от инцидента к инциденту накапливается. Попадая в водные экосистемы, радиоизотопы плутония, как правило, не выводятся из них, а преимущественно перераспределяются в компонентах экосистемы, в том числе накапливаются гидробионтами [1].

Использование радиоизотопов плутония в ядерных технологиях продолжается, и вероятность поступления плутония в окружающую среду и в живые организмы сохраняется. Поэтому важно изучать перераспределение изотопов плутония между водой и гидробионтами, оценивать их накопительную способность, чтобы отслеживать и научно-обоснованно управлять экологической ситуацией в акваториях, прогнозировать ее, тем самым обеспечивать не только защиту биоты от возможного негативного техногенного влияния, но также и безопасное рациональное использование ресурсов водных экосистем для нужд человека.

Согласно рекомендательным документам Росгидромета, представительными объектами морских экосистем в рамках оценки радиационно-экологического воздействия на объекты природной среды, являются рыбы, моллюски и макроводоросли, так называемые, референтные виды [2]. В связи с этим, целью работы было проведение количественной оценки концентрирующей способности представителей рекомендованных групп гидробионтов из Севастопольской бухты в отношении антропогенных радиоизотопов плутония $^{239,240}\text{Pu}$.